

УДК 532.517.4

ОПТИМИЗАЦИЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭНЕРГООБМЕННЫМИ ПРОЦЕССАМИ В АНИЗОТРОПНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ

Колупаев Б.Б., Клепко В.В.

*Институт химии высокомолекулярных соединений НАН Украины
(Харьковское шоссе, 48, Киев, 02160)*

В соответствии с эргодическими принципами статистической термодинамики предложена модель гетерогенных систем на основе гибкоцепных полимеров как набор постоянно усложняющихся подсистем. Указаны пути направленного регулирования энергообменными процессами в анизотропных композициях. Методом конформных и квазиконформных отображений рассчитано и проанализировано распределение температурного поля в системах с учетом оптимизации процесса теплопереноса.

Введение

Несмотря на определенные успехи в исследовании кинетики процесса теплообмена, теория оптимизации направленного его регулирования в случае гибкоцепных полимеров еще далека от решения поставленных научно-технических задач. Это обусловлено, прежде всего, структурными особенностями полимеров и аналитическими затруднениями при решении единой системы уравнений энергообмена в композитах. В конечном итоге, это требует новых эвристических методов и алгоритмов в управлении, исследовании, использовании сложных систем. При этом особый интерес представляют анизотропные композиты, спектр практического применения которых довольно широк.

В связи с этим целью настоящей работы явилось создание физической модели гетерогенных систем на основе гибкоцепных линейных полимеров (ГПС), которая позволила бы использовать математические методы для рассмотрения и анализа процессов теплообмена. В работе использован метод конформного и квазиконформного отображения, с помощью которого исследованы распределение температурного поля и теплового потока в слабоанизотропных ГПС. Это позволяет целенаправленно подойти к оптимизации управления энергообменными процессами в полимерных композициях.

Модель

Исходя из научно-практических задач, особый интерес представляет получение, исследование и использование структурно-ориентированных полимерных систем [1]. Для описания структурообразований в ГПС будем проводить двойное усреднение в пространстве x, y, z и во времени t , выделяя макромолекулу полимера в особую подсистему [2], набор которых образует структуру материала. Структура полимера – взаимное расположение в пространстве, внутреннее строение и характер взаимодействия (связи) между структурными элементами, образующими макроскопическое тело. При этом, структурный элемент – характеристическая частица, образующая в достаточно большом наборе себе подобных, уровень структурной организации. Структурные элементы макромолекул – звенья цепи. Макромолекулы, исследуемых линейных полимеров (поливинилхлорид (ПВХ)), выделим в особую подсистему, поскольку их свойства, к которым можно применить термины термодинамики и статистики малых систем [3], позволяют трактовать полимерное

состояние как особую форму конденсации вещества [4]. Следовательно, свойства макромолекул (закодированная в их “структурная” информация) передается через все последующие уровни надмолекулярной организации полимеров. Последнее означает, что макроскопические свойства предопределяются макромолекулярной структурой, но передаются через надмолекулярную организацию, зависящую от предыстории образца. Путем физической и/или химической модификации с помощью внешних силовых, энергетических полей и ингредиентов направленно влияют на структурообразования систем [5], создавая анизотропность среды.

Рассмотрим перенесение тепла в виде теплопроводности в линейном гибкоцепном полимере, анизотропные свойства которого обусловлены ориентацией суперсеток (микроблоков) макромолекул под действием внешних сил [4] и наполнителей [2]. Для упрощения считаем, что теплоперенос осуществляется носителями субстанции одного типа. Следуя Больцману [5], выделим из макросистемы часть ее площади ΔS ($\Delta S \ll S$, где S – площадь образца), которая представляет собой структурную подсистему. Согласно закону сохранения энергии определим удельный поток энергии тепловых носителей с учетом, что вектор плотности теплового потока \bar{v} в какой-либо точке на ΔS не совпадает с направлением нормали к изотерме, проходящей через эту точку. Для этого рассмотрим распределение температуры (T) и теплового потока в двухмерном анизотропном полимерном теле, ограниченном четырьмя гладкими кривыми. Предположим, что каждая компонента \bar{v} в точке является функцией $grad T$ в этой точке, т. е.

$$\lambda_{11} \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda_{12} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial \psi}{\partial y}; \quad \lambda_{21} \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda_{22} \frac{\partial T}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (1)$$

где $\lambda = (\lambda_{i,j})_{i,j=1,2}$ – тензор теплопроводности; $\psi = \psi(x, y)$ – функция теплового потока, то есть, если $\psi(x, y) = \psi_1$ и $\psi(x, y) = \psi_2$ – две “крайних” линии потока, то $\psi_1 - \psi_2$ характеризует тепловой поток через соответствующую трубку течения исследуемого образца – области $G_z = ABCD$, ограниченной кривыми $AB = \{z = x + iy; f_1(x, y) = 0\}$; $BC = \{z; f_2(x, y) = 0\}$; $CD = \{z; f_3(x, y) = 0\}$; $DA = \{z; f_4(x, y) = 0\}$. Решение системы (1) общепринятыми методами вызовет определенные затруднения [7]. Поэтому задачу решения в области G_z системы дифференциальных уравнений (1) при предельных условиях

$$T|_{AB} = T_*; \quad T|_{CD} = T^*; \quad \psi|_{DA} = 0; \quad \psi|_{BC} = Q, \quad (2)$$

где Q – неизвестный полный тепловой поток (находится в процессе решения задачи), сводим к квазиконформному отображению $\omega = \omega(z) = T(x, y) + i\psi(x, y)$ области G_z на соответствующую область комплексного потенциала $G_\omega = \{\omega: T_* < T < T^*, 0 < \psi < Q\}$. С целью обеспечения гладкости данного отображения в узловых точках A, B, C, D на функции $f_i(x, y) = 0$, $i = \overline{1,4}$, накладываем следующие условия

$$\Theta_M + \tilde{\Theta}_M = \frac{\pi}{2}, \quad \text{где} \quad \cos \Theta_M = \frac{f_{i-1x}'(M)f_{ix}'(M) + f_{i-1y}'(M)f_{iy}'(M)}{\sqrt{f_{i-1x}'^2(M) + f_{i-1y}'^2(M)} \sqrt{f_{ix}'^2(M) + f_{iy}'^2(M)}}, \quad (3)$$

$$\cos \tilde{\Theta}_M = \frac{\lambda_{11} f_{j_x}^{\prime 2}(M) + (\lambda_{12} + \lambda_{21}) f_{j_x}'(M) f_{j_y}'(M) + \lambda_{22} f_{j_y}^{\prime 2}(M)}{\sqrt{f_{j_x}^{\prime 2}(M) + f_{j_y}^{\prime 2}(M)} \sqrt{(\lambda_{11} f_{j_x}'(M) + \lambda_{12} f_{j_y}'(M))^2 + (\lambda_{21} f_{j_x}'(M) + \lambda_{22} f_{j_y}'(M))^2}}, \quad (4)$$

$$M = A, B, C, D, f_0(M) \stackrel{df}{=} f_4(M), j = \begin{cases} 1, & i = 1, 2, \\ 3, & i = 3, 4. \end{cases}$$

Они означают, что в точках M касательные к соответствующим линиям потока тепла должны на столько отклоняться от нормалей к эквипотенциальным линиям, на сколько анизотропия тела отклоняет от них вектор скорости теплового потока.

Аналоги условий ортогональности в окрестностях предельных участков при этом примут вид:

$$-f_{k_x}'(x, y) y_\varphi + f_{k_y}'(x, y) x_\varphi = \sqrt{f_{k_x}^{\prime 2}(x, y) + f_{k_y}^{\prime 2}(x, y)} \sqrt{x_\varphi^2 + y_\varphi^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_k}, \quad k = 1, 3, \quad (5)$$

$$\cos \Theta_k = \frac{\lambda_{11} f_{k_x}^{\prime 2}(x, y) + (\lambda_{12} + \lambda_{21}) f_{k_x}'(x, y) f_{k_y}'(x, y) + \lambda_{22} f_{k_y}^{\prime 2}(x, y)}{\sqrt{f_{k_x}^{\prime 2}(x, y) + f_{k_y}^{\prime 2}(x, y)} \sqrt{(\lambda_{11} f_{k_x}'(x, y) + \lambda_{12} f_{k_y}'(x, y))^2 + (\lambda_{21} f_{k_x}'(x, y) + \lambda_{22} f_{k_y}'(x, y))^2}}$$

$$f_{l_x}'(x, y) y_\psi - f_{l_y}'(x, y) x_\psi = \sqrt{f_{l_x}^{\prime 2}(x, y) + f_{l_y}^{\prime 2}(x, y)} \sqrt{x_\psi^2 + y_\psi^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_l}, \quad l = 2, 4, \quad (6)$$

$$\cos \Theta_l = \frac{\lambda_{11} f_{l_x}^{\prime 2}(x, y) + (\lambda_{12} + \lambda_{21}) f_{l_x}'(x, y) f_{l_y}'(x, y) + \lambda_{22} f_{l_y}^{\prime 2}(x, y)}{\sqrt{f_{l_x}^{\prime 2}(x, y) + f_{l_y}^{\prime 2}(x, y)} \sqrt{(\lambda_{11} f_{l_x}'(x, y) + \lambda_{12} f_{l_y}'(x, y))^2 + (\lambda_{21} f_{l_x}'(x, y) + \lambda_{22} f_{l_y}'(x, y))^2}} \quad (7)$$

Косинус угла отклонения вектора скорости \vec{v} от $\text{grad}T$ в произвольной внутренней точке $z = x + iy$ вычисляется по формуле

$$\cos \tilde{\Theta} = \frac{\lambda_{11} T_x^{\prime 2} + (\lambda_{12} + \lambda_{21}) T_x' T_y' + \lambda_{22} T_y^{\prime 2}}{\sqrt{T_x^{\prime 2} + T_y^{\prime 2}} \sqrt{(\lambda_{11} T_x' + \lambda_{12} T_y')^2 + (\lambda_{21} T_x' + \lambda_{22} T_y')^2}}.$$

В случае, если $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(T, \psi)$ (нелинейная прямая задача), обратную к (1) – (2) задачу на квазиконформное отображение $z = z(\omega) = x(T, \psi) + iy(T, \psi)$ области G_ω на G_z при неизвестном Q запишем в виде:

$$\lambda_{11}(T, \psi) \frac{\partial y}{\partial \psi} - \lambda_{12}(T, \psi) \frac{\partial x}{\partial \psi} = \frac{\partial x}{\partial T}, \quad \lambda_{21}(T, \psi) \frac{\partial y}{\partial \psi} - \lambda_{22}(T, \psi) \frac{\partial x}{\partial \psi} = \frac{\partial y}{\partial T}, \quad (8)$$

$$\begin{cases} f_1(x(T_*, \psi), y(T_*, \psi)) = 0, & f_3(x(T^*, \psi), y(T^*, \psi)) = 0, & 0 \leq \psi \leq Q, \\ f_2(x(T, Q), y(T, Q)) = 0, & f_4(x(T, 0), y(T, 0)) = 0, & T_* \leq T \leq T^*, \end{cases}$$

где $Q = \int_{AB} v_n dl$; dl – элемент длины дуги. При этом соответствующие уравнения

второго порядка для нахождения функций $x = x(T, \psi)$ и $y = y(T, \psi)$ имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial T^2} + A(T, \psi) \frac{\partial^2 x}{\partial T \partial \psi} + B(T, \psi) \frac{\partial^2 x}{\partial \psi^2} + C(T, \psi) \frac{\partial x}{\partial T} + D(T, \psi) \frac{\partial x}{\partial \psi} = 0, \\ \frac{\partial^2 y}{\partial T^2} + A(T, \psi) \frac{\partial^2 y}{\partial T \partial \psi} + B(T, \psi) \frac{\partial^2 y}{\partial \psi^2} + E(T, \psi) \frac{\partial y}{\partial T} + F(T, \psi) \frac{\partial y}{\partial \psi} = 0, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \lambda_{12} - \lambda_{21}, \quad B = \lambda_{11}\lambda_{22} - \lambda_{21}\lambda_{12}, \quad C = \frac{\lambda_{11\psi}\lambda_{21} - \lambda_{11T}\lambda_{21T}}{\lambda_{11}} - \lambda_{21\psi}, \\ E &= \lambda_{12\psi} - \frac{\lambda_{22\psi}\lambda_{12} + \lambda_{22T}\lambda_{12T}}{\lambda_{22}}, \\ D &= \lambda_{22\psi}\lambda_{11} + \lambda_{12T}\lambda_{21} - \lambda_{21\psi}\lambda_{12} - \lambda_{12\psi}\lambda_{21} + \frac{\lambda_{11\psi}\lambda_{21}\lambda_{12} - \lambda_{12}\lambda_{11T}\lambda_{21T}}{\lambda_{11}}, \\ F &= \lambda_{11\psi}\lambda_{22} - \lambda_{21T}\lambda_{12} - \lambda_{21\psi}\lambda_{12} - \lambda_{12\psi}\lambda_{21} + \frac{\lambda_{22\psi}\lambda_{21}\lambda_{12} + \lambda_{21}\lambda_{22T}\lambda_{12T}}{\lambda_{22}}. \end{aligned}$$

Использование такого подхода предусматривает как переход от прямых задач к задачам на квазиконформные отображения соответствующих областей квазикомплексного потенциала на исходные (физические) области, так и тот факт, что они содержат неизвестные параметры (тепловой поток) при дополнительных условиях при их решении [7].

Соответственно [2], разностные аналоги в области G_ω^γ запишем как:

$$\begin{cases} x_{i+1,j} + x_{i-1,j} - 2(1 + \gamma^2 B_{i,j})x_{i,j} + \gamma^2 B_{i,j}(x_{i,j-1} + x_{i,j+1}) + \frac{\gamma}{4} A_{i,j}(x_{i+1,j+1} + x_{i-1,j-1} - \\ - x_{i+1,j-1} - x_{i-1,j+1}) + \frac{\Delta T}{2}(\gamma D_{i,j}(x_{i,j+1} - x_{i,j-1}) + C_{i,j}(x_{i+1,j} - x_{i-1,j})) = 0, \\ y_{i+1,j} + y_{i-1,j} - 2(1 + \gamma^2 B_{i,j})y_{i,j} + \gamma^2 B_{i,j}(y_{i,j-1} + y_{i,j+1}) + \frac{\gamma}{4} A_{i,j}(y_{i+1,j+1} + y_{i-1,j-1} - \\ - y_{i+1,j-1} - y_{i-1,j+1}) + \frac{\Delta T}{2}(\gamma F_{i,j}(y_{i,j+1} - y_{i,j-1}) + E_{i,j}(y_{i+1,j} - y_{i-1,j})) = 0, \end{cases} \quad (10)$$

$$i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n},$$

$$\begin{cases} f_1(x_{0,j}, y_{0,j}) = 0, \quad f_3(x_{m+1,j}, y_{m+1,j}) = 0, \quad j = \overline{0, n+1}, \\ f_2(x_{i,n+1}, y_{i,n+1}) = 0, \quad f_4(x_{i,0}, y_{i,0}) = 0, \quad i = \overline{0, m+1}, \end{cases} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & -f_{1x}'(x_{0,j}, y_{0,j})(y_{1,j} - y_{0,j}) + f_{1y}'(x_{0,j}, y_{0,j})(x_{1,j} - x_{0,j}) = \\ & = \sqrt{f_{1x}'^2(x_{0,j}, y_{0,j}) + f_{1y}'^2(x_{0,j}, y_{0,j})} \sqrt{(x_{1,j} - x_{0,j})^2 + (y_{1,j} - y_{0,j})^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{10,j}}, \\ & -f_{3x}'(x_{m+1,j}, y_{m+1,j})(y_{m,j} - y_{m+1,j}) + f_{3y}'(x_{m+1,j}, y_{m+1,j})(x_{m,j} - x_{m+1,j}) = \\ & = \sqrt{f_{3x}'^2(x_{m+1,j}, y_{m+1,j}) + f_{3y}'^2(x_{m+1,j}, y_{m+1,j})} \sqrt{(x_{m+1,j} - x_{m,j})^2 + (y_{m+1,j} - y_{m,j})^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{3m+1,j}}, \\ & f_{2x}'(x_{i,n+1}, y_{i,n+1})(y_{i,n} - y_{i,n+1}) - f_{2y}'(x_{i,n+1}, y_{i,n+1})(x_{i,n} - x_{i,n+1}) = \\ & = \sqrt{f_{2x}'^2(x_{i,n+1}, y_{i,n+1}) + f_{2y}'^2(x_{i,n+1}, y_{i,n+1})} \sqrt{(x_{i,n} - x_{i,n+1})^2 + (y_{i,n} - y_{i,n+1})^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{2i,n+1}}, \end{aligned}$$

$$f_{4x}'(x_{i,0}, y_{i,0})(y_{i,1} - y_{i,0}) - f_{4y}'(x_{i,0}, y_{i,0})(x_{i,1} - x_{i,0}) =$$

$$= \sqrt{f_{4x}'^2(x_{i,0}, y_{i,0}) + f_{4y}'^2(x_{i,0}, y_{i,0})} \sqrt{(x_{i,1} - x_{i,0})^2 + (y_{i,1} - y_{i,0})^2} \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{4i,0}},$$

$$i = \overline{0, m+1}, \quad j = \overline{0, n+1}, \quad (12)$$

$$\gamma = \frac{1}{(m+1)(n+1)} \sum_{i,j=0}^{m,n} \frac{\sqrt{(x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i,j})^2} + \sqrt{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})^2}}{a_1 + a_2},$$

$$a_1 = \sqrt{(\lambda_{11}(y_{i,j+1} - y_{i,j}) - \lambda_{12}(x_{i,j+1} - x_{i,j}))^2 + (\lambda_{21}(y_{i,j+1} - y_{i,j}) - \lambda_{22}(x_{i,j+1} - x_{i,j}))^2},$$

$$a_2 = \sqrt{(\lambda_{11}(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) - \lambda_{12}(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}))^2 + (\lambda_{21}(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) - \lambda_{22}(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}))^2}, \quad (13)$$

где $A_{i,j} = A(T_i, \psi_j)$, $B_{i,j} = B(T_i, \psi_j)$, $C_{i,j} = C(T_i, \psi_j)$, $D_{i,j} = D(T_i, \psi_j)$,
 $E_{i,j} = E(T_i, \psi_j)$, $F_{i,j} = F(T_i, \psi_j)$.

Если $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(x, y)$, тогда обратная задача является существенно нелинейной и уравнения для нахождения $x = x(T, \psi)$ и $y = y(T, \psi)$ имеют вид:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\lambda_{11}(x, y)\lambda_{22}(x, y) - \lambda_{21}(x, y)\lambda_{12}(x, y)}{\lambda_{11}(x, y)} \frac{\partial x}{\partial \psi} - \frac{\lambda_{21}(x, y)}{\lambda_{11}(x, y)} \frac{\partial x}{\partial T} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\lambda_{11}(x, y)} \frac{\partial x}{\partial T} + \frac{\lambda_{12}(x, y)}{\lambda_{11}(x, y)} \frac{\partial x}{\partial \psi} \right) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\lambda_{11}(x, y)\lambda_{22}(x, y) - \lambda_{21}(x, y)\lambda_{12}(x, y)}{\lambda_{22}(x, y)} \frac{\partial y}{\partial \psi} + \frac{\lambda_{12}(x, y)}{\lambda_{22}(x, y)} \frac{\partial y}{\partial T} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\lambda_{22}(x, y)} \frac{\partial y}{\partial T} - \frac{\lambda_{21}(x, y)}{\lambda_{22}(x, y)} \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) &= 0, \end{aligned} \right. \quad (14)$$

Соответственно (10) – (13) записываются их разностные аналоги.

Алгоритм приближенного решения задачи строим по разностному аналогу уравнений (9), (14), определенным предельным условиям, условиям ортогональности и квазиконформного сходства в маленьком объеме соответствующих параллелограммов сетевой области:

$$G_\omega^\gamma = \left\{ \begin{aligned} (T_i; \psi_j); T_i = T_* + \Delta T i, i = \overline{0, m+1}; \psi_j = \Delta \psi j, j = \overline{0, n+1}; \\ \Delta T = \frac{T^* - T_*}{m+1}; \Delta \psi = \frac{Q}{n+1}; \gamma = \frac{\Delta T}{\Delta \psi}; m, n \in N \end{aligned} \right\}. \quad (15)$$

Эксперимент, результаты и их обсуждение

Исследовали ПВХ суспензионной полимеризации марки С-6359-М ГОСТ 14332-78, очищенный из раствора [6], ММ $1,4 \cdot 10^5$. Образцы готовили методом горячего прессования в T - p режиме при $T = 393$ К и $p = 10,0$ МПа. Анизотропию ГПС создавали с помощью электрического взрыва Си-проволочек в ограниченном объеме системы [7]. Температурную зависимость λ ПВХ и композиций на его основе определяли с помощью модифицированной установки ИТ- λ -400 при скорости нагревания образца 3 град/мин. Распределение теплового потока и температуры в системе определяли согласно [2]. Расчет соответствующих величин проводили согласно соотношений (9), (14). По мере нагревания системы осуществляли корреляцию величины $\lambda_i = \lambda_{i0} + \varepsilon |\text{grad } T|$ к моменту ее стабилизации. Предложенный метод позволяет осуществлять оптимизацию управления изменением теплопроводности с помощью

внешних температурных, силовых полей и наночастиц Cu, а также описать функцию $\lambda = \varphi(T)$ соотношением Симпсона-Лагранжа:

$$\lambda = \lambda_0 + \alpha[\varphi(T)].$$

Для исходного ПВХ:

$$\lambda = 0,148 + 1,36 \cdot 10^{-4} T - 0,2 \cdot 10^{-6} T^2,$$

ПВХ+0,1 об.% Cu; $\lambda = 0,277 + 1,75 \cdot 10^{-4} T - 0,4 \cdot 10^{-6} T^2$.

Таким образом, предложенный метод позволяет осуществить оптимизацию управления энергообменными процессами путем аналитического определения величины эффективной теплопроводности λ ГПС с учетом направленного регулирования анизотропии среды.

Литература

- [1] Слущкер А.И. Анизотропия свойств полимеров // Энциклопедия полимеров. М.: Советская энциклопедия. Вып. 2, т. 1, 1974.
- [2] Колупаев Б.С. Релаксационные и термические свойства наполненных полимерных систем / Под ред. С.Я. Френкеля. Львов: Вища школа, 1980.
- [3] Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. О нерешенных проблемах статистической физики макромолекул. М.: Наука, 1985.
- [4] Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. Л.: Наука, 1965.
- [5] Фрадков А.Л. О применении кибернетических методов в физике // УФН. 2005, т. 175, №2. С. 113-139.
- [6] Колупаев Б.Б. Исследование вязкоупругих свойств металлонаполненного ПВХ на основе потенциала меж- и внутримолекулярного взаимодействия // ИФЖ. 2007, т. 80, №1. С. 178-185.
- [7] Белоусов Н.Н., Венгеров И.Р., Пашинская Е.Г. Теплофизические аспекты получения и применения деформируемых наноматериалов // ФТ ВД. 2007, т. 17, №3. С. 103-121.